

Atomárna štruktúra a unikátne vlastnosti intermetalík, amorfných, nanokryštalických a komplexných kovových zliatin

Predmet výskumu

Projekt bol zameraný na vysvetlenie javov a štruktúr v objemoch a na povrchoch novovytváraných komplexných kovových metastabilných amorfných, nanokryštalických a intermetalických systémov. Požadovaná kombinácia funkčných vlastností v skúmaných systémoch bola dosiahnutá prostredníctvom cieľenej technologickej, kompozičnej, štruktúrnej a tvarovej modifikácie na rôznych rozmerových škálach (od tvarovania vzoriek amorfných pásov s rádovo centimetrovými rozmermi, až po "tvarovanie" nano-zrn a ich rozhraní). Študované vlastnosti, štruktúry a mikro-mechanizmy riadiace ich vznik a stabilitu sme komplexne analyzovali a interpretovali najmodernejšími výpočtovými a experimentálnymi metódami od makro/mikro úrovne až po úroveň atomárneho usporiadania a elektrónovej štruktúry.

Ciele projektu

K špecifickým cieľom patrili:

- Preskúmanie procesov nukleácie v rýchlochladených systémoch, najmä stanovenie významu prítomnosti malého množstva prímies napr. Cu, Nb, P, Si a C v systémoch typu Fe-Co-B, Fe-Ni-B či Fe-Sn-B na vytvorenie nanokryštalických zrn v amorfnej matici a o alternatívnu prípravu takejto štruktúry s náhradou 4d prechodových prvkov a strategických prvkov vzácnych zemín v nich dostupnejšími prvkami.
- Vysvetlenie vzťahu medzi rýchlym ochladením taveniny, tvorbou viacvrstvových pásov (dvojvrstvy, trojvrstvy) a tvorbou špeciálnych usporiadaní napr. typu "q-glass" v systéme Al-Si s prídavkom Fe, Co alebo Ni. Využitie existujúcich ab-initio metód a alternatívnych metód materiálových výpočtov založených na klasických potenciáloch na predpoved stabilných atómových štruktúr.
- Určenie štruktúry povrchov v atomistickom rozlíšení pre vybrané zliatiny prechodových kovov ako Pd, Cu, Au vzhľadom na ich chemickú reaktivitu a následné modelovanie vybraných katalytických reakcií, vysvetlenie doposiaľ neobjasnených katalytických vlastností nanoporozného Au.

- Analýza štruktúry rozhraní mnohvrstvových RQ pásov na atomárnej škále vzhľadom na mechanizmy atómového transportu medzi jednotlivými vrstvami, v ideálnom prípade na vzorkách s rôznym chemickým zložením a s rozdielnymi magnetickými vlastnosťami vrstiev
- Preskúmanie termodynamiky spracovania amorfných kovových systémov v okolí fázového prechodu skla, posúdenie možnosti tvarovania amorfných štruktúr v oblasti podchladenej kvapaliny s ohľadom na zachovanie pružnosti a ťažnosti tvarovaného amorfného materiálu.

Dosiahnuté výsledky

Dosiahli sme významný pokrok v pochopení katalytických reakcií na povrchoch nanoporozného Au a intermetalík na báze Pd a Cu, vysvetlili sme selektívnu hydrogenáciu, dehydrogenáciu a oxidáciu v týchto štruktúrach. Preskúmali sme možnosti vzniku kváziperiodických usporiadaní v početných systémoch na báze Al-Pd-Cu a Al-Cu-Fe, javy stability a príčiny vzniku lokálnej neusporiadanosti a nových sporiadaní v systémoch Al-Si-(Fe, Co, Ni), identifikovali sme nové fázy v nich. Spravili sme významný pokrok v atomárne rozlíšenej štruktúrnej analýze skúmaných systémov a jej interpretácii. Vyvinuli sme nové systémy rýchlochladených magneticky mäkkých materiálov bez strategických prvkov so zvýšenou hodnotou magnetizácie v nasýtení a riaditeľným tvarom hysteréznej slučky dosahujúcich ultanízke hodnoty koercivity. Pripravili sme nové zliatiny na báze Mn(Al,Bi), ktoré sa zaraďujú medzi perspektívne systémy permanentných magnetov bez prvkov vzácnych zemín. Vypracovali a implementovali sme nové metódy nekonvenčného spracovania amorfných a nanokryštalických materiálov umožňujúcich riadenie najmä magnetických a mechanických vlastností vyvinutých materiálov vrátane ich tvaru a hrúbky. Významne sme pokročili vo vývoji a využití špeciálnych techník tepelného spracovania vo vysokých magnetických poliach na cieľnú modifikáciu vlastností nových materiálov.

zodpovedný riešiteľ

Ing. Peter Švec, DrSc.

riešiteľská organizácia

Fyzikálny ústav SAV

spoluriešiteľská organizácia

Ústav experimentálnej fyziky SAV

(RNDr. Ivan Škorvánek, CSc.)

termín riešenia

7/2016 – 12/2019

finančné prostriedky z APVV

249 509 €

číslo projektu

APVV-15-0621

Prínos pre prax

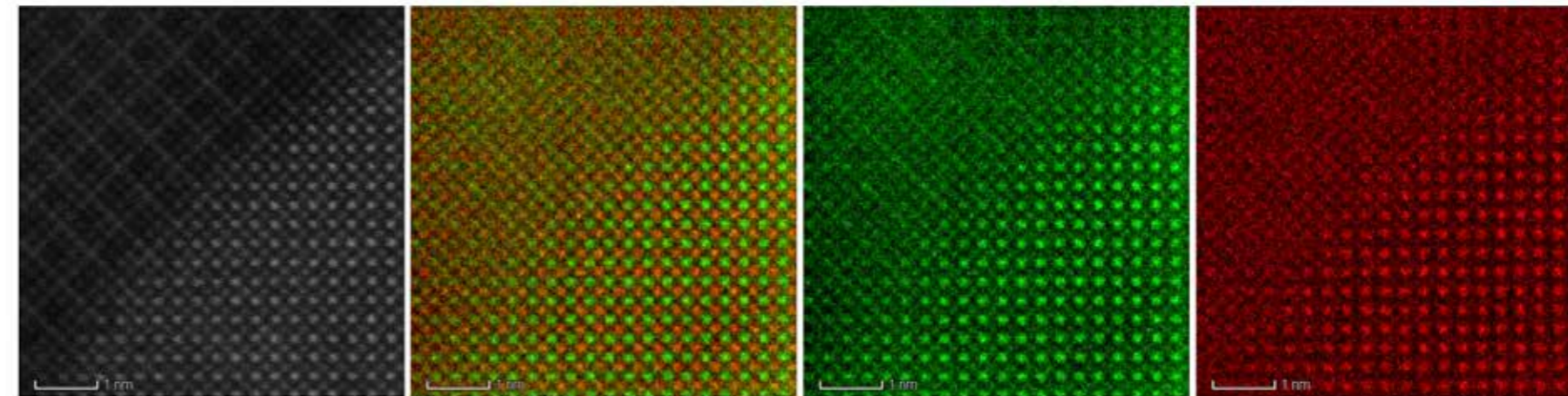
Nové poznatky a metódy v oblasti prípravy a nekonvenčného spracovania vybraných systémov intermetalík, amorfných, nanokryštalických a komplexných kovových zliatin poskytli obecný pokrok v poznaní a priamo aj nové materiály s výnimočnými vlastnosťami vhodnými pre ich aplikácie v rámci Industry 4.0 v oblasti katalýzy vodíka a acetylénu, v oblasti magnetických materiálov pre energetiku a senzorku a pre ďalšie aplikácie v špičkových priemyselných technológiách. Získané výsledky boli prenesené do dvoch patentov popisujúcich prípravu unikátnych dvoj- a viacvrstvových rýchlochladených kovových skiel a tvarovanie rovinných rýchlochladených pásov do trojrozmerných objektov bez straty elasticity a amorfného stavu.

Obr. 1 / Zaznam HAADF (vľavo) s mapami EDS (Mn-K_o zelená, Al-K_o červená) tetragonálnej fázy τ-AlMn (os zóny [001]) vzniknutá z rýchlochladeného hexagonálneho ε-AlMn po žiahaní pri 713 K počas 50 minút nevykazujúca chemický gradient na medzifázovom rozhraní; marker 1 nm.

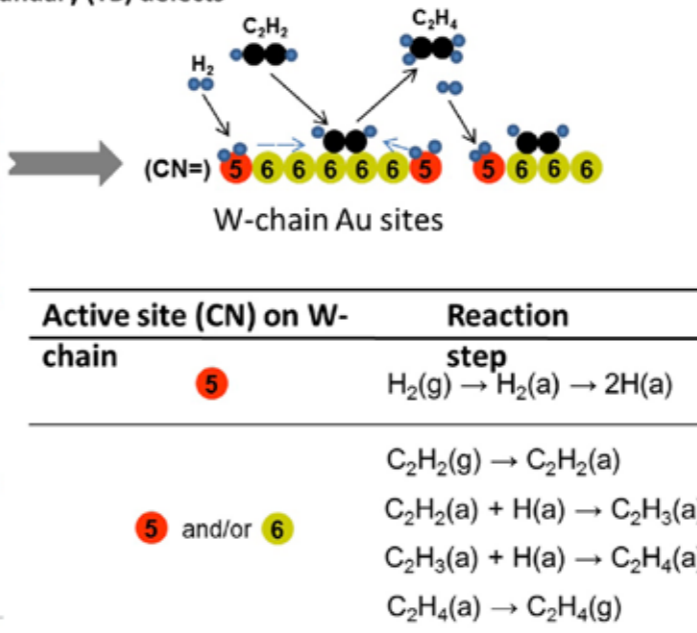
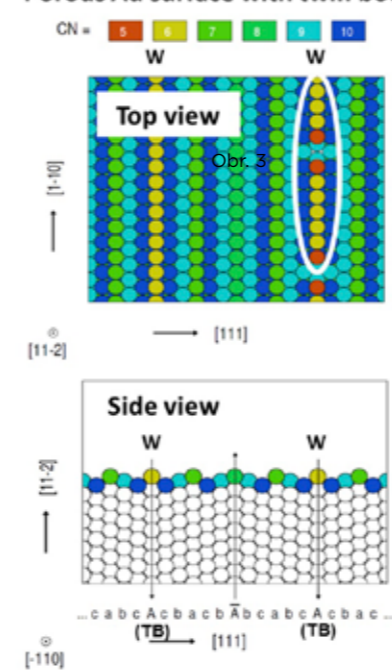
Obr. 2 / Frekvenčné a poľné závislosti magnetoimpedančného pomeru pre jedno- a dvojvrstvové pásy typu FINEMET.

Obr. 3 / Schéma selektívnej katalýzy acetylénu na etylén na povrchu nanoporozného Au, v ktorom spontánne vznikajú tzv. „twinning defects“ prejavujúce sa na povrchu ako reťazce nízkokoordinovaných atómov Au, tzv. „W-chains“.

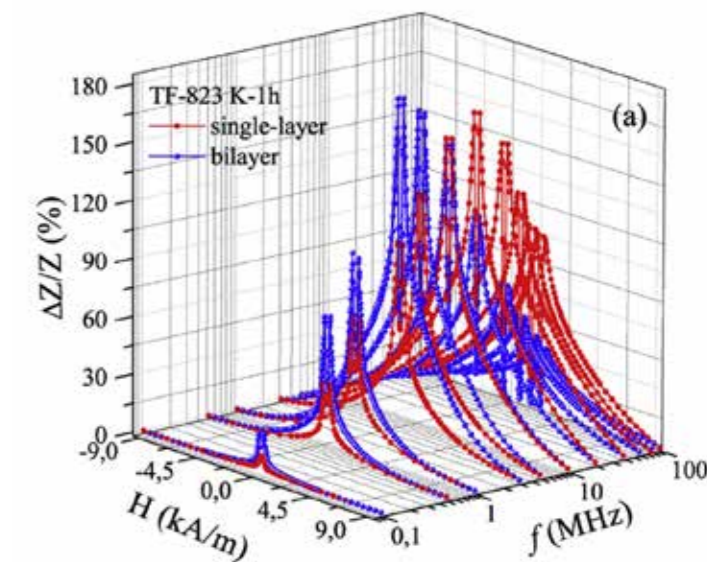
Obr. 1



Porous Au surface with twin boundary (TB) defects



Obr. 3



Obr. 2